

Computer helfen bei der Suche nach der Struktur der Stoffe

Gespräch mit Prof. Dr. P. Paufler über den internationalen Sommerkurs für Kristallographie an der KMU

UZ: Unter Kristallographie wird die Lehre nicht viel vorstellen können. Womit beschäftigt sich diese Wissenschaft?

Prof. Paufler: Die Kristallographie ist ihrem Charakter nach eine Materialwissenschaft. Sie beschäftigt sich mit allen Arten von Material, sowohl fest als auch flüssig, und stellt dabei die Frage nach dem Zusammenhang zwischen atomarem Aufbau der Stoffe und ihren Eigenschaften. Wir versuchen auf experimentellem Weg, so zum Beispiel mit Röntgenstrahlen und dem Elektronenmikroskop den atomaren Aufbau und mit dem Polarisationsmikroskop die Struktur der Stoffe aufzudecken.

UZ: Wo finden diese Kenntnisse über die Struktur der Stoffe ihre Anwendung?

Prof. Paufler: Diese Untersuchungen sind von großer Bedeutung für die Praxis. Hierzu vielleicht nur ein Beispiel aus der pharmazeutischen Industrie: Ohne genauere Kenntnis der Stoffeigenschaften, also sprich der räumlichen Struktur, können wir keine wirksamen Nebenwirkungen, die aufgrund unbekannter, aber in kleinen Mengen vorhandener Stoffe mit anderer Struktur auftreten, nicht erkennen und so auch nicht vermeiden. Solche hohen Forderungen an die Reinheit der Produkte werden aber nicht nur in der Pharmazie, sondern zunehmend in anderen Bereichen und Industriezweigen gestellt.

Unter Wissenschaftsbereich beschäftigt sich insbesondere mit den Aufbaumöglichkeiten bestimmter industrieller und -schlacken. Dabei wenden wir uns unter anderem den Verbindungshalbleitern für die Optoelektronik zu. Auch hier stehen natürlich die Fragen der Struktur bzw. der Fehlerhaftigkeit bestimmter Strukturen im Mittelpunkt des Interesses.

UZ: Erstmals führte die diesjährige von der Internationalen Union für Kristallographie veranstaltete Sommerkurs Wissenschaftler aus aller Herren Länder in die DDR. Welche Bedeutung hatte diese Sommerkurs für uns?

Prof. Paufler: Dieser so alle ein bis zwei Jahre veranstaltete Sommerkurs fand in nicht nur erstmals unserer Republik, sondern auch zum ersten Mal wieder in einem sozialistischen Land statt. Er erwuchs für uns als Veranstaltung eine hohe politische Verantwortung. Heute können wir feststellen: Wir haben mit der Durchführung des Kurses international an Ansehen gewonnen.

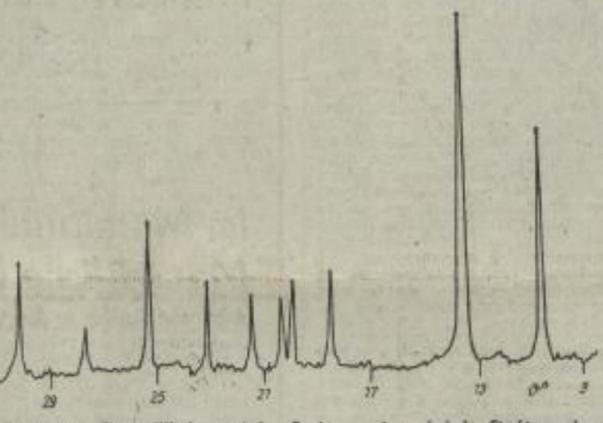
UZ: Wieviel Wissenschaftler nahmen an diesem Sommerkurs teil?

Prof. Paufler: Es kamen insgesamt 108 Teilnehmer aus 17 Ländern nach Leipzig, den weitesten Weg hatten Wissenschaftler aus Kanada und Indien.

UZ: Und wie gestaltete sich der tägliche Ablauf des Kurses?

Prof. Paufler: Für einen solchen internationalen Kurs sind 108 Teilnehmer relativ wenig, aber die angestrebte intensive Arbeit machte eine Begrenzung des Teilnehmerkreises unumgänglich. In Seminargruppen zu etwa zehn Mann eingeteilt, hatten die Teilnehmer ein straffes Arbeitspensum zu absolvieren. Vier Stunden Vorlesung und drei Stunden Seminar standen täglich auf dem Programm. Jeder Wissenschaftler mußte sich dabei aus einem Angebot von 30 Seminaren zehn auswählen, die er besucht.

So wies der Sommerkurs eigentlich eine hohe Qualität auf. Wesentlich Anteil an seinem Gelingen hatten natürlich die Lehrkräfte. Zwanzig Wissenschaftler waren es, davon



Das ist ein röntgendiffraktometrisches Spektrum, wie es bei der Strukturanalyse Verwendung findet. Dabei wird diese Kurve in Zahlenwerte zerlegt und mathematisch - zunehmend unter Einsatz moderner Rechenarbeit - ausgewertet. Foto: Kommichau

schon Analysen solch eine bedeutende Rolle spielen?

Prof. Paufler: Das hängt natürlich mit der Spezifik der kristallographischen Untersuchungen zusammen. Wir wollen ja die Struktur von Stoffen ermitteln. Die Abstände der Molekülbausteine in den unterschiedlichen Substanzen bewegen sich allerdings in Dimensionen von Zehnmillionsteln eines Millimeters, sind also mit dem menschlichen Auge nicht wahrnehmbar. Dagegen eignen sich Röntgenstrahlen besonders gut zur Abbildung von Struktureinheiten.

Aber anders als etwa bei der Erzeugung eines scharfen Bildes durch einen Diaprojektor fehlt bei der zur Untersuchung verwendeten Röntgen-Diffraktometrie das Objektiv. Der Kristallograph muß aus einem Zwischenbild, das keine Ähnlichkeit mit der untersuchten räumlichen Struktur hat und in der Form eines unterschiedlich geschwizten Röntgenfilms oder einer mit dem Zählrohr gemessenen Verteilung der Röntgenstrahlintensitäten vorliegt, auf die Struktur schließen.

Das wäre auch durch einen rein mathematischen Vorgang (die Fourier-Synthese) eindeutig möglich, wenn es gelänge, die zeitliche Beziehung der einzelnen Röntgenwellen beim Eintreffen auf dem Film oder im Zählrohr zu vermessen. Das erfordert allerdings Zeitmessungen des Bruchteils einer Schwingungsperiode, also etwa 10⁻¹³ Sekunden. Dies ist gegenwärtig nicht möglich.

Nach Art des Kristallinisten versucht deshalb der Strukturforscher, die Phase anhand einer gründlichen Analyse der Tatsachen zu erraten. Durch Anwendung bestimmter statistischer Beziehungen zwischen den Intensitäten gelingt neuerdings die direkte Phasenbestimmung für einen Teil der Röntgenwellen und schließlich über ein spezielles Rechenverfahren die Konstruktion des wahrscheinlichen Strukturbildes. Die Automatisierung der Röntgen-Diffraktometrie und die rechenfortschrittliche Fortschritte sorgen für eine praktisch ausreichende Zuverlässigkeit der Strukturbestimmung. Aus dem Grunde ist die moderne Kristallographie ohne Computer und Rechenarbeit nicht mehr denkbar.

UZ: Während des Kurses gab es erstmals eine direkte Datenübertragung von der Datenbank Karlsruhe (BRD) über Telefonleitung nach Leipzig. Welche Absichten wurden damit verfolgt?

Prof. Paufler: Wir hatten uns Möglichkeiten geschaffen, den Rechner in Karlsruhe zu benutzen. In ihm sind unter anderem die Atomnummern aller bekannten Substanzen, es sind ungefähr 100 000, gespeichert. Durch die mögliche Benutzung dieser Daten verringert sich nicht nur die Zeit zur Erstellung einer Analyse beträchtlich, sondern wir treten in eine völlig neue Qualität der Materialforschung, wir können unsere Untersuchungen wesentlich zielgerichteter vornehmen. Mit Hilfe dieser Datenübertragung konnten wir den Teilnehmern die Vorzüge praktisch demonstrieren, und sie hatten Gelegenheit, selbst damit zu arbeiten.



Blick ins Rechentechnische Kabinett der Sektion TV. Alle Studenten erhalten hier eine Grundlagenausbildung in Informatik. Foto: UZ/Archiv

In den Dokumenten des XI. Parteitages ist wie in keinen anderen vorher die herausragende Bedeutung der Wissenschaft für die Gestaltung der entwickelten sozialistischen Gesellschaft hervorgehoben worden. Damit ist auch eindeutig fixiert, was die Parteilieferung von den Wissenschaftlern in der Landwirtschaft erwartet:

- die Schaffung eines hohen Bildungsniveaus,
- hohe wissenschaftliche Leistungen und
- die Erziehung und Ausbildung von Studenten, die glühende Verehrer der Einführung des wissenschaftlich-technischen Fortschritts sind, um, wie Genosse Erich Honecker auf dem Parteitag im Bericht des ZK ausgesprochen hat, die Landwirtschaft zu einem Zweig angewandter Wissenschaft zu entwickeln.

Dabei spielt die Beherrschung der Schlüsseltechnologien wie Mikroelektronik und Informatik sowie Biotechnologie eine entscheidende Rolle. Bei der zu er-

stgen Weiterbildungslehrgänge für Wissenschaftler wurden ebenfalls durchgeführt. Das alles erfordert natürlich bei 300 Studenten je Studienjahr von uns einen wesentlich höheren Aufwand in der Aus- und Weiterbildung, aber wir sind bereit, diesen zu tragen, weil wir um die Rolle der Schlüsseltechnologie Informatik in der Landwirtschaft wissen.

Für die gesamte Landwirtschaft ist der Aufbau eines rechnergestützten Informationssystems geplant. Das Ziel besteht darin, die bereits seit den 60er Jahren auf der Basis der ESER-Technik entstandenen zentralen Informationsverarbeitungssysteme mit den sich auf der Grundlage der Büro- und Personalcomputertechnik herausbildenden Systemen der Landwirtschaftsbetriebe zu verbinden. Die AG „OF Biometrie, Informationsverarbeitung“ beim Beirat für Agrarwissenschaften hat deshalb vorgeschlagen, im Rahmen der nutzerorientierten

Die Informatik steht an der Sektion TV für alle auf dem Lehrprogramm

Bessere Möglichkeiten der Informatikausbildung durch die Eröffnung eines Rechentechnischen Kabinetts

wartenden Neuprofilierung der Hoch- und Fachschulen der Landwirtschaft auf der Grundlage des Beschlusses zur Ingenieur- und Ökonomenausbildung wird deshalb diesen Disziplinen eine entsprechende Aufmerksamkeit geschenkt werden.

Im April dieses Jahres wurde im WB Agrarökonomie das neu eingerichtete Rechentechnische Kabinett unserer Sektion, das mit elf Kleincomputern vom Typ KC 85/1 und 85/2 ausgestattet ist, eröffnet. Das bedeutet für unser Kollektiv „Anwendung mathematischer Methoden und Informationsverarbeitung in der Landwirtschaft“ in der Grundlageninformatik- und Mathematikausbildung, aber auch für die Fachdisziplinen einen beachtlichen Schritt vorwärts. Ist es doch jetzt möglich, jeden Studenten unserer Sektion mit der Dialogsprache BASIC vertraut zu machen. Bisher wurde, abgesehen von der Nutzung der ESER-Technik, die Bedienung und Programmierung des Tischrechners K 1002/3 gelehrt.

Jeder Fortschritt wirft jedoch bekanntlich neue Fragen auf. Da in den Wissenschaftsbereichen etwa 20 K 1002/3 vorhanden sind, bestand in der wissenschaftlich-produktiven Tätigkeit die Möglichkeit, die in der Grundlagenausbildung erworbenen Fähigkeiten und Fertigkeiten auch anzuwenden. Wenn wir dieses bewährte Prinzip fortsetzen wollen, müßte nach der Konzentration im Rechentechnischen Kabinett bei weiterer Bereitstellung von Computern der dezentrale Einsatz in den Wissenschaftsbereichen erfolgen.

Weiterbildung der Praktiker

Der wissenschaftliche Beirat für Agrarwissenschaften beim MHF hat vorgeschlagen, an unserer Sektion für die gesamte DDR eine Aus- und Weiterbildungs-einrichtung in Agrarinformatik für Tierproduzenten/Veterinärmediziner zu schaffen. Mit diesem Vorschlag wird sicherlich auch unsere bisherige Arbeit gewürdigt, aber diese Aufgabe kann an unserer Sektion nur erfüllt werden, wenn uns einerseits einige Informatikspezialisten zugeführt werden; es können sicherlich auch Mathematiker oder Physiker sein, die sich für Informatik sowie Landwirtschaft und Biologie interessieren, andererseits eine enge Zusammenarbeit mit dem ORZ unverzichtbar wird.

Abschließend noch einige Worte zur Forschung. Wir haben in unserem Kollektiv umfangreiche Erfahrungen bei der Nutzung der ESER-Technik. Unsere Forschungsschwerpunkte waren und sind die Modellierung der Reproduktion der Tierplätze der DDR und die Bestimmung der optimalen landwirtschaftlichen Produktionsstruktur auf Bezirks-, Kreis- sowie Kooperationsebene. In Auswertung der Plenartagungen und des XI. Parteitages werden wir uns nun in interdisziplinärer Arbeit der Schaffung eines rechnergestützten Arbeitsplatzes für den Leiter der Tierproduktion der AIV zuwenden.

Doz. Dr. sc. E. SCHULZE, Sektion TV, WB Agrarökonomie

Qualifizierung auch der Wissenschaftler

Mit der Informatikausbildung des 1. Studienjahres im RTK haben wir bereits erste Erfahrungen gesammelt. Der Direktor unserer Sektion hat festgelegt, daß kein Student uns mehr verläßt, ohne daß er eine Informatik-Grundausbildung in RTK erhalten hat. Dazu werden wir die volle Möglichkeit nutzen. Es besteht das Ziel, bis Ende 1987 diese zusätzliche Qualifizierung abzuschließen. Deshalb ist es auch notwendig, daß bis Ende 1987 die Qualifizierung der Wissenschaftler abgeschlossen wird. Die er-

KURSPROGRAMM

des Interdisziplinären Seminars für wissenschaftlichen Nachwuchs (INTSEM) für 1986/87

- 1. bis 4. Oktober 1986 „Anfänge der Wirtschaft und intensiv erweiterte Reproduktion“
Leitung: Prof. Dr. W. Kupferschmid, Hochschule für Ökonomie, „Bruno Leuschner“, Berlin, Sektion Außenwirtschaft
- 5. bis 11. Oktober 1986 „Nichtlinearitäten in laserstabilisierten Prozessen: Experimente, Theorie und Anwendungen in Physik, Chemie, Biologie und Technologie“
Leitung: Prof. Dr. B. Wilhelm, Friedrich-Schiller-Universität Jena, Sektion Physik
- 12. bis 21. Oktober 1986 „Physikalisch-technische Entwicklung und Einsatzgebiete medizinischer Bildgebung und Bildverarbeitung“
Leitung: Prof. Dr. S. Gursky, Prof. Dr. H.-G. Schulz, Karl-Marx-Universität, Bereich Medizin (Radiologische Klinik)
- 22. bis 7. November 1986 „Strömungsmechanik: Modelle, Methoden und aktuelle Anwendungen“
Leitung: Prof. Dr. J. Altenhöhn, Technische Hochschule „Otto von Guericke“ Magdeburg, Sektion Maschinenbau
- 8. bis 21. November 1986 „Pathogenetische Basiskonzepte der Pathologie“
Leitung: Prof. Dr. F. Hübner, Karl-Marx-Universität, Bereich Medizin (Hautklinik)
- 22. bis 28. November 1986 „Wachstumsförderfaktoren unter den Bedingungen der intensiv erweiterten Reproduktion“
Leitung: Prof. Dr. D. Hunold, Hochschule für Ökonomie

Das INTSEM hat die Aufgabe, zur Entwicklung eines qualifizierten wissenschaftlichen Nachwuchses beizutragen, die interdisziplinäre Arbeit zu fördern und bei der systematischen Verbreitung aktueller Ergebnisse der Wissenschaft und progressiver wissenschaftlicher Methoden zu helfen.

Während der Kurse werden persönliches Kennenlernen und intensiver wissenschaftlicher Austausch zwischen Teilnehmern und Vortragenden verschiedener Wissensgebiete und verschiedener Einrichtungen angestrebt.

Bewerbung bzw. Delegation erfordert das Einverständnis der zuständigen staatlichen Leitung und die Empfehlung eines Hochschullehrers bzw. des zuständigen Leiters. Die Empfehlung kann kurz sein, soll aber die persönliche Meinung des Unterzeichnenden zur wissenschaftlichen Leistungsfähigkeit des Befürworteten zum Ausdruck bringen.

Über die Teilnahme am Kurs entscheidet der Direktor des INTSEM auf Vorschlag des Kursleiters.

An jedem Kurs können etwa 25 bis 25 Personen teilnehmen.

Anschrift des Interdisziplinären Seminars: Karl-Marx-Universität, INTSEM (85), PSP 920 Leipzig, 7010.

- 1. bis 3. Dezember 1986 „Mikrorechnersysteme“ (Arbeitstitel)
Leitung: Prof. Dr. D. Bohmann, Technische Hochschule Karl-Marx-Stadt, Sektion Informations-technik
- 6. bis 13. Januar 1987 „Methodische und theoretische Probleme der gegenwärtigen Literaturwissenschaft“
Leitung: Prof. Dr. K. Pezold, Karl-Marx-Universität, Sektion Germanistik und Literaturwissenschaft
- 15. bis 23. Januar 1987 „Algebraische und logische Grundlagen der Informatik“
Leitung: Doz. Dr. K. Jantke, Humboldt-Universität Berlin, ORZ
- 24. bis 30. Januar 1987 „Bruno Leuschner“ Berlin, Sektion Sozialistische Volkswirtschaft
- 31. bis 3. Februar 1987 „Moderne Methoden sprachwissenschaftlicher Forschung“
Leitung: Prof. Dr. A. Neubert, Karl-Marx-Universität, Sektion Theoretische und angewandte Sprachwissenschaft
- 10. bis 21. Februar 1987 „Robotertechnik“
Leitung: Prof. Dr. U. Simon, Technische Hochschule Karl-Marx-Stadt, Sektion Fertigungsprozess und Fertigungsmittel
- 22. bis 28. Februar 1987 „Historische und aktuelle Probleme der Entwicklung der sozialistischen Gesellschaft“
Leitung: Prof. Dr. E. Kalbe, Karl-Marx-Universität, Sektion Ge-
- 28. Januar bis 6. Februar 1987 „Ethische Grundlagen und soziale Verantwortung der Medizin in der sozialistischen Gesellschaft“
Leitung: Prof. Dr. A. Thom, Karl-Marx-Universität, Carl-Sudhoff-Institut für Geschichte der Medizin
- 30. März bis 10. April 1987 „Rechnergestützte Ingenieurarbeit, CAD/CAM“
Leitung: Prof. Dr. H. Weber, Technische Hochschule Karl-Marx-Stadt, Sektion Fertigungsprozess und Fertigungsmittel
- 15. bis 16. April 1987 „Nationale und internationale Rechtsfragen der Forschungsarbeit und des wissenschaftlich-technischen Fortschritts“
Leitung: Prof. Dr. W. Linden, Martin-Luther-Universität Halle, Sektion Staats- und Rechtswissenschaften
- 17. bis 20. April 1987 „Ethische Grundlagen und soziale Verantwortung der Medizin in der sozialistischen Gesellschaft“
Leitung: Prof. Dr. A. Thom, Karl-Marx-Universität, Carl-Sudhoff-Institut für Geschichte der Medizin
- 21. bis 28. Juni 1987 „Wissenschaft und Kultur“
Leitung: Prof. Dr. K.-F. Wessel, Humboldt-Universität Berlin, Sektion Marxistisch-leninistische Philosophie